Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U000884

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-04-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Танін Володимир Олександрович

2. Tanin Volodymyr Olexandrovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.10

Назва наукової спеціальності: Біоорганічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 15-04-2016

Спеціальність за освітою: 8.04010103

Місце роботи здобувача: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: 02660, Україна, м. Київ, вул. Мурманська, 1

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.220.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: 02660, Україна, м. Київ, вул. Мурманська, 1

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.23

Тема дисертації:

1. Нові підходи до in silico дослідження інгібіторів протеїнтирозинфосфатази 1B

2. New approaches for in silico study of inhibitors of protein tyrosine phosphatase 1B

Реферат/анотація:

1. Протеїнтирозинфосфатаза 1B та синтетичні інгібітори цього ензиму. Розробка нових підходів до in silico дослідження потенційних інгібіторів протеїнтирозинфосфатази 1B, розробка нових методів відбору сполук, які найбільш вірогідно проявлять себе як сильні інгібітори щодо PTP1B. Молекулярний докінг, QSAR, кінетичний і статистичний аналіз. Вперше було проведено порівняння конформацій PTP1B згідно даних PDB-файлів для характеристики ліганд-зв'язувальних центрів та рухливості залишків амінокислот. Центроїди кластерів запропоновано як репрезентативні структури PTP1B для проведення розрахунків методом молекулярного докінгу. Розроблено методологію молекулярного докінгу для вивчення зв'язування лігандів у великих зв'язувальних порожнинах. Побудовано три моделі QSAR для оцінювання активності інгібіторів PTP1B. Розроблено оціночні функції для молекулярного докінгу, що базуються на відомих оціночних функціях програм AutoDock і AutoDock Vina, а також RF Score, які показали вищу ефективність у порівнянні з вихідними функціями. Обґрунтовано застосування нових підходів для пошуку інгібіторів PTP1B. Розроблені

методи вже використовують для відбору потенційних інгібіторів для різноманітних ферментів. Сфера використання розробок - біоорганічна хімія.

2. Protein tyrosine phosphatase 1B and synthetic inhibitors of this enzyme. Development of new approaches for in silico study of potential inhibitors of protein tyrosine phosphatase 1B, development of new selection methods for compounds, which are the most expected to show themselves as powerful inhibitors of PTP1B. Molecular docking, QSAR, kinetic and statistic analysis. It was first to compare conformations of PTP1B in accordance with data from PDB-files for characterization of ligand-bonding centers and mobility of amino acid residues. Cluster centroids are proposed to be used as representative structures of PTP1B to carry out calculations by the method of molecular docking and further analysis of gained results. It was developed methodology of molecular docking for investigation of ligand-bonding in large binding cavities. It was built three QSAR models for estimation of PTP1B inhibitors activity. It was first developed new scoring functions for molecular docking, which are based on the known scoring functions of programs AutoDock and AutoDock Vina, and also RF Score, which showed higher comparing with basic initial functions. Implementation of new approaches for PTP1B inhibitors search was grounded. Developed methods are already used for selection of potential inhibitors for various enzymes. Usage sphere for the developments is bioorganic chemistry.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Вовк Андрій Іванович

2. Vovk Andriy Ivanovich

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Роженко Олександр Борисович

2. Роженко Олександр Борисович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03, 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Карпов Павло Андрійович

2. Карпов Павло Андрійович

Кваліфікація: к.б.н., 03.00.11, 03.00.20

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Кухар Валерій Павлович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Кухар Валерій Павлович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.